

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

9. Programy pro molekulové modelování II

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

VMD

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Program pro vizualizaci molekul. Po bezplatné registraci dostupný pro MS Windows a Linux.

Avogadro

http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page

Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Volně dostupný pro MS Windows a Linux.

Přehled funkcionality: <https://www.youtube.com/watch?v=xdmLoBILmqS>

Nemesis

<https://lcc.ncbr.muni.cz/whitezone/development/nemesis/>

Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Alfa verze pro Linux. Testovací verze pro MS Windows na vyžádání.

Cvičení XYZ formát

1. V textovém editoru vytvořte soubor popisující model vody s následujícími parametry. Délka vazeb O-H bude 1 Å. Vazebný úhel H-O-H bude 90°. Uložte jej do domovského adresáře jako **water.xyz**
2. Vytvořený soubor načtěte do programu VMD.
3. Ověřte skutečnou délku vazeb a velikost úhlu H-O-H. (VMD Main >Mouse->Label, správa popisků v VMD Main >Graphics>Labels)
4. Molekulu vody zobrazte v následujících modelech: Lines, CPK, Licorice, VDW.

OpenBabel

Open Babel is a chemical toolbox designed to speak the many languages of chemical data. It's an open, collaborative project allowing anyone to search, convert, analyze, or store data from molecular modeling, chemistry, solid-state materials, biochemistry, or related areas.

http://openbabel.org/wiki/Main_Page

Konverze programem openbabel:

```
$ module add openbabel  
$ babel input.xyz output.mol2
```

alternativně


```
$ babel -ixyz input.txt -omol2 output.out
```

Seznam podporovaných formátů:

```
$ babel -L formats
```

Nápověda:

```
$ babel -H
```

 **velké H**

Cvičení

1. Aktivujte modul openbabel.
2. Vypište formáty, které instalovaná verze open babelu podporuje.
3. Zkonvertujte soubor **water.xyz** do formátu Sybyl Mol2 format a uložte jej pod názvem **water.mol2**
4. Otevřete soubor **water.mol2** v textovém editoru a diskutujte význam jeho částí.
5. Zkonvertujte soubor **water.xyz** do formátu InChI a uložte jej po názvem **water.txt**
6. Otevřete soubor **water.txt** v textovém editoru a diskutujte význam jeho částí.

Cvičení I

1. Načtete do programu **Avogadro** molekulu ze souboru **water.xyz**
2. Provedte optimalizaci její geometrie. Jaké je optimální délka vazby a vazebný úhel?
3. Zobrazte molekulu v různých grafických reprezentacích.
4. Načtete do programu **Nemesis** molekulu ze souboru **water.xyz** (Import Structure -> OpenBabel)
5. Zobrazte molekulu v různých grafických reprezentacích.
6. Provedte optimalizaci její geometrie. Jaké je optimální délka vazby a vazebný úhel? Srovnajte s výsledky získanými v programu Avogadro. Vysvětlete případné rozdíly.

Cvičení II

1. V programu **Nemesis** nakreslete strukturní vzorec molekuly benzoové v projektu Sketch Structure
2. Převeďte molekulu do 3D reprezentace. Ohodnoťte kvalitu převodu.
3. V programu **Nemesis** nakreslete strukturní vzorec molekuly cyklohexanu v projektu Sketch Structure.
4. Převeďte molekulu do 3D reprezentace. Ohodnoťte kvalitu převodu.
5. V projektu Sketch Structure programu **Nemesis** vložte molekulu fullerenu C_{60} ve formátu SMILES (View->Insert->SMILES...).
6. Převeďte molekulu do 3D reprezentace. Ohodnoťte kvalitu převodu.
7. Úlohu s molekulou C_{60} zopakujte v programu **Avogadro**. Jakým způsobem lze získat lepší model?